

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	電気通信大学大学院 情報理工学研究科 先進理工学専攻 博士前期課程		
氏 名	加藤 豪	学籍番号	1033028
論 文 題 目	結晶多形超格子の物性評価		
<p>要 旨</p> <p>現在、ナノスケールデバイスに利用されているヘテロ構造は基本的に異種物質同士の接合界面を持つ。しかし、ヘテロ構造デバイスでは、その作製条件に応じて、界面での格子ミスフィットにより欠陥等が生成し、それらがデバイスの高機能化を妨げる原因ともなる。一方、炭化ケイ素(SiC)や窒化ホウ素(BN)などは結晶多形を持つことが知られている。結晶多形では稠密面の積層配列によって分類され、バンドギャップや誘電率が異なる。この、同一組成で構造・電子状態が異なる結晶多形をヘテロ構造デバイスに用いれば、格子ミスフィットがないので、欠陥のないホモマテリアルヘテロ界面を作製できる。</p> <p>本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いてIV族、IV-IV族、III-V族、II-VI族の結晶多形超格子に注目し、「ホモマテリアルヘテロ界面構造」のバンドオフセット・誘電率について評価した。</p> <p>3C と 2H によって構成される $(3C)_2(2H)_3$ 超格子はIV族超格子ではタイプ I、IV-IV族、III-V族、II-VI族超格子ではタイプ II となることがわかった。平均ポテンシャル法で求めた価電子帯オフセットは、系統的な変化は見られなかった。各超格子の伝導帯端(CBM)・価電子帯端(VBM)の面平均確率密度分布を調べたところ、IV族超格子はCBMもVBMも2H側に波動関数がピークを持ち、これはタイプ I の超格子であることを裏付けている。一方、他の超格子では、タイプ II 型の超格子であることを反映し、CBMは3C側にVBMは2H側に波動関数のピークを持つ。また、極性を持つ超格子ではanion原子とcation原子の存在により内部電界が[000-1]方向に発生しており、波動関数の重心が[0001]にシフトしていた。</p> <p>さらに、Wakui と Nakamura らの誘起電荷法を用いてこれらの $(3C)_2(2H)_3$ 超格子の局所誘電率分布を評価した。$(3C)_2(2H)_3$ 超格子の局所誘電率は3C的な部分では低くなり、2H的な部分では高くなり、超格子の局所誘電率は構成する結晶多形に由来することがわかった。</p>			